



MODIFICACIÓN DE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE NANOLISTONES DE NITRURO DE BORO DEBIDO AL DOPAJE CON CARBONO

Francisco Villanueva Mejía,¹ José Luis Rivera Rojas², Pedro Navarro Santos¹

¹Instituto de Investigaciones Químico – Biológicas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia Michoacán, México.

²Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia Michoacán, México.

Email: fvillamejia@gmail.com

El nitruro de boro hexagonal (BN) es un material de dos dimensiones con hibridación tipo sp^2 . Comparando su estructura cristalina contra el grafeno, los parámetros de red del BN varían únicamente 1.7% respecto al grafeno¹. El BN es un buen aislante (con ancho de banda prohibida aproximado de 5.5 eV), impidiendo la conductividad térmica y resistencia a la corrosión. Dentro de sus aplicaciones, el BN puede ser utilizado como un aislante en la industria metal-mecánica. Para aprovechar la planaridad de estas nanoestructuras en aplicaciones optoelectrónicas, es necesario buscar alguna forma de reducir su ancho de banda prohibido. Una forma de hacerlo es mediante el dopaje sustitucional. Recientemente, Zeng *et al.*, sintetizaron nanolistones de nitruro de boro (BNNRs) desarrollando nanotubos de nitruro de boro mediante grabado de plasma², lo cual ha sido de interés buscando la aplicaciones de estos materiales hacia posibles aplicaciones tecnológicas. En este trabajo, se realizaron cálculos basados en la DFT para estudiar superficies nanoestructuradas de BN funcionalizado con impurezas de átomos de carbono, encontrando un efecto directo en las propiedades electrónicas debido al dopaje. Dependiendo de la subred del BNNR en la que se realizó la sustitución, una banda electrónica se ocupa o desocupa parcialmente cambiando la naturaleza aislante del BNNR a metálico, se exploró la concentración de dopaje sustitucional de 1.7 a 7.1% encontrando en algunos casos BNNRs semiconductores. En esta plática también se presentan algunos descriptores de reactividad como el potencial electrostático molecular y la aproximación de las funciones de Fukui para identificar los sitios que favorecen las interacciones con nucleófilos y electrófilos respectivamente.

1. Giovannetti, G.; Khomyakov, P. A.; Brocks, G.; Kelly, P. J.; van den Brink, J. Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations. *Physical Review B* 2007, 76, 073103.
2. Zeng, H.; Zhi, C.; Zhang, Z.; Wei, X.; Wang, X.; Guo, W.; Bando, Y.; Golberg, D. "White Graphenes": Boron Nitride Nanoribbons via Boron Nitride Nanotube Unwrapping. *Nano Letters* 2010, 10, 5049-5055.